Environment Canada Environnement Canada

National Hydrology Research Institute

NHRI PAPER NO. 37
IWD TECHNICAL BULLETIN NO. 152

A Foreward Finite Difference Procedure with Exponentially Increasing Time Steps: The Method of Successive Squaring

A. Vandenberg

NHRI

INLAND WATERS / LANDS DIRECTORATE
NATIONAL HYDROLOGY RESEARCH INSTITUTE
NATIONAL HYDROLOGY RESEARCH CENTRE
SASKATOON, SASKATCHEWAN, 1987
(Disponible en français sur demande)

Published by authority of
the Minister of the Environment

© Minister of Supply and Services Canada 1987

Cat. No. En 36-503/152E

ISBN 0-662-15489-4

Contents

	Page
ABSTRACT	iv
RÉSUMÉ	v
INTRODUCTION	1
THE METHOD	1
EXAMPLES	6
EFFICIENCY IN COMPARISON WITH THE STANDARD FORWARD METHOD	11
APPLICATION TO IMPLICIT FORMULATIONS	12
IN CONCLUSION	13

Illustrations

Figure 1.	Notation used in the finite difference approximation	3
Figure 2.	Configuration, initial values, and boundary values of the first example	6
Figure 3.	Configuration of the second example	10

Abstract

The forward finite difference formulation of linear partial differential equations leads to the matrix equation

$$u^{n+1} = Au^n + c$$

in which the matrix A and the vector c are constant whenever the differential equation and boundary conditions have no time-dependent coefficients. By a slight artifice, this equation can be changed to

$$u^{n+1} = A^* u^n$$

after which, on the m^{th} successive squaring of A*, the value of u is calculated at a time that is 2^m times the original time step.

Résumé

La formulation à différences finies en avant d'équations aux dérivées partielles conduit à l'équation matricielle

$$u^{n+1} = Au^n + c$$

dans laquelle la matrice A et le vecteur c sont des constantes, tandis que l'équation différentielle et les conditions limites ne possèdent pas de coefficients dépendant du temps. Par un artifice simple, cette équation peut s'écrire

$$u^{n+1} = A^* u^n$$

après quoi, à la $m^{ième}$ mise au carré successive de A*, la valeur de u est calculée au moment égal à 2^m fois le pas temporel initial.

A Foreward Finite Difference Procedure with Exponentially Increasing Time Steps: The Method of Successive Squaring

A. Vandenberg

INTRODUCTION

Of all the procedures for the numerical solution of partial differential equations, the forward finite difference method is the simplest, since values of the independent variable at the space nodes after a time step Δt are calculated explicitly from values before the time step, avoiding the need for simultaneous solution at all the nodes, which is characteristic of implicit procedures. The forward method, however, has been abandoned in practice, since the time step must always be kept under a maximum critical size for the method to remain stable. In this paper, however, it will be shown that for certain types of boundary value problems involving linear differential equations, the step size of the forward finite difference formulation can be increased each iteration by a factor of two.

THE METHOD

To develop the method, the parabolic equation in two-space dimensions will be used, although the method may be applied equally well to other types of linear equations:

$$\partial u/dt = \alpha(x,y)\partial^2 u/\partial x^2 + \beta(x,y)\partial^2 u/\partial y^2 + \gamma(x,y) \qquad (1)$$

In conjunction with Equation 1, a set of boundary conditions is prescribed:

$$u = U(x,y) \text{ on } \Gamma_1 \tag{2a}$$

$$du/ds = \delta(x,y) \text{ on } \Gamma_2 \tag{2b}$$

$$c_1 u + c_2 du/ds = \varepsilon(x,y) \text{ on } \Gamma_3 \tag{2c}$$

where du/ds = the derivative in the direction perpendicular to the boundary Γ_2 or Γ_3, c_1 and c_2 are constants, and the α, β, γ, δ, ε, and U must be independent of time.

In the forward finite difference method, Equation 1 is replaced by its finite difference approximation

$$u_{i,j}^{n+1} = u_{i,j}^{n} + l_{i,j} (u_{i-1,j}^{n} - 2u_{i,j}^{n} + u_{i+1,j}^{n}) + k_{i,j} (u_{i,j-1}^{n} - 2 u_{i,j}^{n} + u_{i,j+1}^{n}) + \gamma'_{i,j} \tag{3}$$

where

$$l_{i,j} = \alpha_{i,j} \Delta t/\Delta x^2$$

$$k_{i,j} = \beta_{i,j} \Delta t/\Delta x^2$$

$$\gamma'_{i,j} = \gamma_{i,j} \Delta t$$

the superscript n indicates the value of u at time $t = n\Delta t$, and the subscripts i and j designate the value of the variable at the intersection, in the x-y plane, of the ith vertical grid line and the jth horizontal grid line of the finite difference grid (Fig. 1).

Equation 3 is then applied to each of the intersections (nodes) in turn, except for nodes on the boundary element Γ_1, which have a constant value. Boundary conditions of type (2b) and type (2c) are

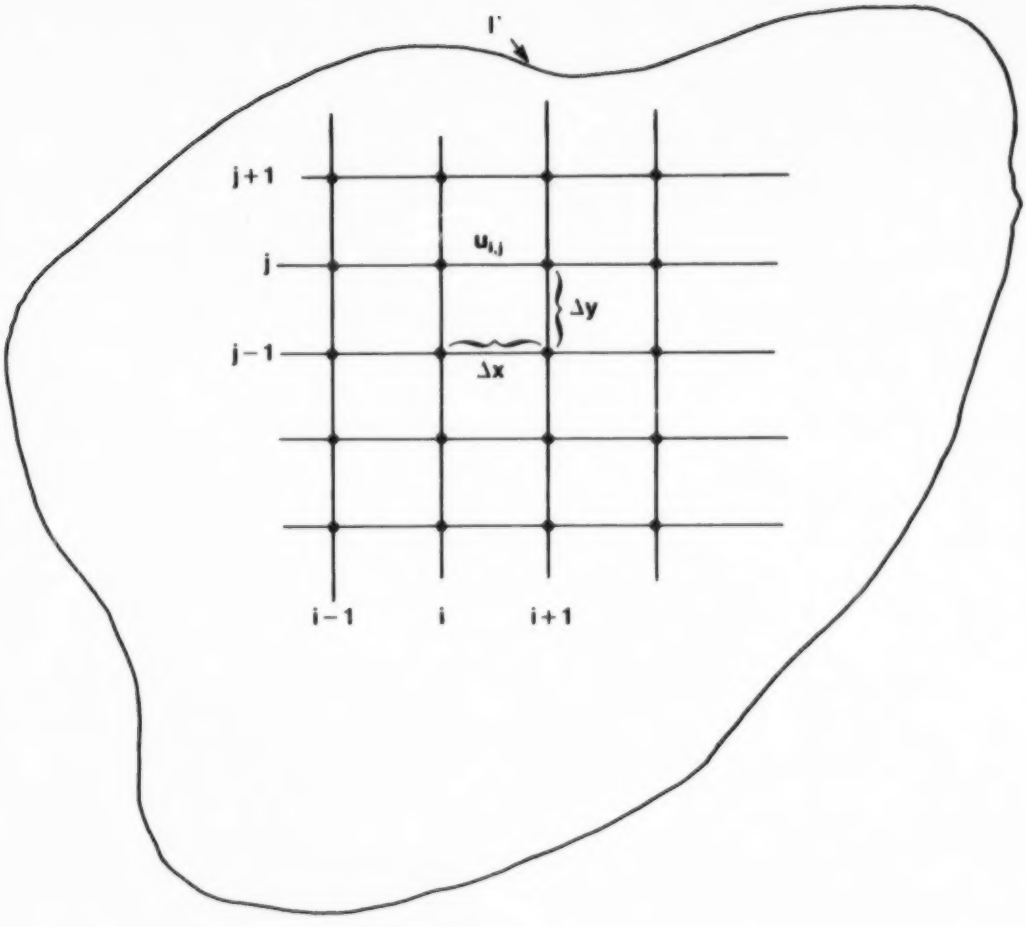

Figure 1. Notation used in the finite difference approximation.

replaced by finite difference approximations from which the value of u at the boundary node is expressed in terms of values at nearby internal nodes.

In matrix notation, then, one iteration, which carries the solution forward in time from $t = n\Delta t$ to $t = (n+1)\Delta t$, is expressed by the equation

$$u^{n+1} = Au^{n} + c \qquad (4)$$

where u^n and u^{n+1} are the vectors of nodal values of u at $t = n\Delta t$ and $t = (n+1)\Delta t$, respectively, at all the m nodes where u is not constant; A is the m x m matrix resulting from applying Equation 3 to all of the interior nodes in turn, replacing nonconstant boundary nodes where they occur by appropriate expressions derived from (2b) and (2c); and c is a vector of constant terms deriving from the term $\gamma'_{i,j}$ in Equation 3 and from constant boundary values on Γ_1.

Thus, starting with n = 0, we calculate from u°, the vector of initial conditions:

$$
\begin{aligned}
u^1 &= u(\Delta t) = Au^\circ + c \\
u^2 &= u(2\Delta t) = Au^1 + c = A^2u^\circ + Ac + c \\
u^3 &= u(3\Delta t) = A^3u^\circ + A^2c + Ac + c \\
u^n &= u(n\Delta t) = A^nu^\circ + c \sum_{i=0}^{n-1} A^i
\end{aligned}
\tag{5}
$$

The summation in (5), however, represents a calculating effort that one can very well do without, and it would be much preferable to have, instead of Equation 5, an equation of the form

$$u^n = A^nu^\circ \tag{6}$$

or, in general,

$$u^{k+n} = A^nu^k \tag{7}$$

for then

$$
\begin{aligned}
u^2 &= u(2\Delta t) = A^2u^\circ \\
u^4 &= u(4\Delta t) = A^4u^\circ
\end{aligned}
$$

etc., and successive squaring of A would result in the calculation of u at $t = \Delta t,\ 2\Delta t,\ 4\Delta t$, or in general at $t = 2^n \Delta t$ on the nth iteration.

An equation of type (7) can be obtained from Equation 4 by introducing an additional, dummy variable, $\bar{u}$ as the $(m+1)^{th}$ element of u and assigning to $\bar{u}$ the constant value

$$\bar{u} = 1$$

Equation 4 can then be written as

$$u^{n+1} = A^* u^n \tag{8}$$

where

$$A^* = \left[\begin{array}{cccc|c} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1m} & c_1 \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2m} & c_2 \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots \\ a_{m1} & a_{m2} & \cdots & a_m a_m & c_m \\ \hline 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 \end{array}\right] = \left[\begin{array}{c|c} A & c \\ \hline 0 & 1 \end{array}\right]$$

Thus the matrix now contains the vector of constants c as its last column, which is now regarded as coefficients of the dummy variable $\bar{u}$ in the matrix Equation 8. The last row of the matrix expresses the fact that

$$\bar{u}^{n+1} = \bar{u}^n$$

that is, $\bar{u}$ is a constant.

Thus, all the requirements for solution of Equation 3 by a method of successive squaring are met. The method will be illustrated by two examples.

EXAMPLES

In the first example, the solution of Equation 1 is sought in the domain shown in Figure 2; the function u is constant everywhere along the boundary with values as indicated in Figure 2; the initial values at the three internal nodes are indicated in brackets in Figure 2. There are no source/sink terms: γ is zero everywhere. Obviously the solution will tend to a steady state with u_1, u_2, and u_3 equal to 120, 140, and 160, respectively.

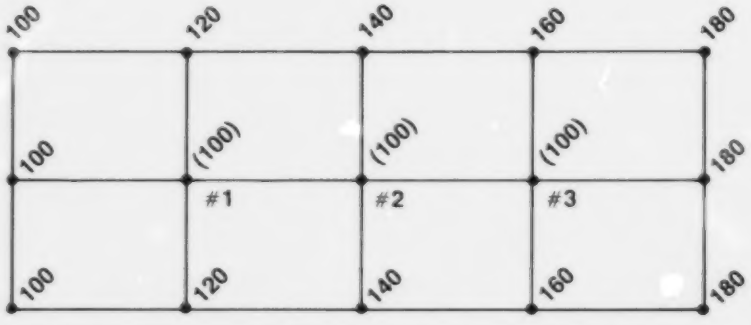

Figure 2. Configuration, initial values, and boundary values of the first example.

Setting $l_{i,j}$ and $k_{i,j}$ equal to 0.2 at all nodes, Equation 3 reduces to the set of three equations:

$$u_1^{n+1} = 0.2u_1^n + 0.2u_2^n + 0.2\ (100 + 120 + 120)$$

$$u_2^{n+1} = 0.2u_1^n + 0.2u_2^n + 0.2u_3^n + 0.2\ (140 + 140)$$

$$u_3^{n+1} = 0.2u_2^n + 0.2u_3^n + 0.2\,(180 + 160 + 160)$$

which, on introduction of $\bar{u}$ is expanded to the set of four equations:

$$u_1^{n+1} = 0.2u_1^n + 0.2u_2^n + 68\,\bar{u}$$

$$u_2^{n+1} = 0.2u_1^n + 0.2u_2^n + 0.2u_3^n + 56\,\bar{u}$$

$$u_3^{n+1} = 0.2u_2^n + 0.2u_3^n + 100\,\bar{u}$$

$$\bar{u} = \bar{u}$$

which also can be written in matrix form:

$$u^{n+1} = A^* u^n$$

where

$$A = \begin{bmatrix} .2 & .2 & 0 & 68 \\ .2 & .2 & .2 & 56 \\ 0 & .2 & .2 & 100 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

Successive squaring of A* results in

$$A^{*2} = \begin{bmatrix} .08 & .08 & .04 & 92.8 \\ .08 & .12 & .08 & 100.8 \\ .04 & .08 & .08 & 131.2 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad A^{*4} = \begin{bmatrix} .014 & .019 & .013 & 113.54 \\ .019 & .027 & .019 & 130.82 \\ .013 & .019 & .014 & 153.47 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

$$A^{*8} = \begin{bmatrix} .00074 & .00104 & .00074 & 119.65 \\ .00104 & .00148 & .00104 & 139.50 \\ .00074 & .00104 & .00074 & 159.65 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad A^{*16} = \begin{bmatrix} - & - & - & 120.0 \\ - & - & - & 140.0 \\ - & - & - & 160.0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

Thus, the powers of A^* converge to all zeros except for the last column, which eventually contains the steady state solution of the problem. This final form is typical of all problems that attain a steady state for $t \to \infty$. It can be noted that further squaring of A^{*16} has virtually no effect, that is, for large n

$$A^{*2n} \sim A^{*n}$$

Nor has the initial condition any influence on the steady state solution, which is completely determined by the boundary conditions.

A further note of interest is the existence of the inverse matrices of A and A^*, A^{-1} and A^{*-1}, respectively. From Equation 4 we have

$$u^n = A^{-1} (u^{n+1} - c) \tag{9}$$

and from Equation 8

$$u^n = A^{*-1} u^{n+1} \tag{10}$$

Either equation can be used to step backwards through time, and there is no particular reason why stepping backwards beyond $t = 0$ would not be permissible. Equation 10 permits us to do so by successive squaring at an increasing rate. It should also be noted, however, that higher powers of A^*, as exemplified by A^{*16} of the example, become increasingly ill-conditioned. Thus the closer the solution is to the steady state, the less accurate becomes the retrieval of previous states.

Continuing the evaluation of the sample solution, we calculate

$$A^{*-1} = \begin{bmatrix} 0 & 5 & -5 & 220 \\ 5 & -5 & 5 & -560 \\ -5 & 5 & 0 & 60 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

and we thus have

$$u^{-1} = u\,(t = -\Delta t) = A^{*-1}\,u^{\circ}$$
$$u^{-2} = u\,(t = -2\Delta t) = A^{*-1}\,u^{-1}$$
$$u^{-3} = u\,(t = -3\Delta t) = A^{*-1}\,u^{-2}$$

which gives

$$u^{-1} = \quad 220, \quad -60, \quad +60$$
$$u^{-2} = \quad -380, \quad +1140, \quad -1340$$
$$u^{-3} = +12620, \quad -14860, \quad +7660$$

Thus, although mathematically correct, the "solutions" at negative t soon become meaningless, physically, in this instance.

In the second example, the result is shown when the system does not converge to a steady state, as for example in the configuration of Figure 3, in which the boundary is of the "no-flux across the boundary" type, that is

$$du/ds = 0 \qquad \text{on } \Gamma$$

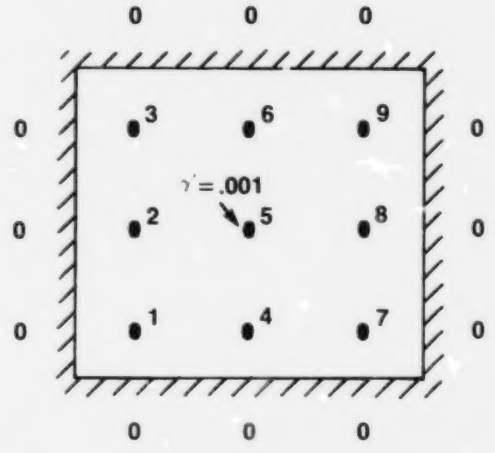

Figure 3. Configuration of the second example.

Thus, for example, both virtual nodes, outside the boundary and opposite node No. 1 in the interior of the region, have the same value at all times as node No. 1. Furthermore a constant source, $\gamma' = .001$, operates at node No. 5 in the centre. Again setting $l_{i,j}$ and $k_{i,j}$ at 0.2, the equivalent of Equation 3 becomes

$$u_{i,j}^{n+1} = 0.2\ (u_{i-1,j}^{n} + u_{i+i,j}^{n} + u_{i,j-1}^{n} + u_{i,j+1}^{n} + u_{i,j}^{n}) + \gamma' \qquad (11)$$

Applying Equation 11 to each of the nine internal nodes of Figure 3, the matrix A* is obtained:

$$A^* = \begin{bmatrix} .6 & .2 & 0 & .2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ .2 & .4 & .2 & 0 & .2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & .2 & .6 & 0 & 0 & .2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ .2 & 0 & 0 & .4 & .2 & 0 & .2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & .2 & 0 & .2 & .2 & .2 & 0 & .2 & 0 & 0.001 \\ 0 & 0 & .2 & 0 & .2 & .4 & 0 & 0 & .2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & .2 & 0 & 0 & .6 & .2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & .2 & 0 & .2 & .4 & .2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & .2 & 0 & .2 & .6 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

After a few successive squarings, the matrix will look like

$$A^{*32} = \begin{bmatrix} .111 & .111 & .111 & .111 & .111 & .111 & .111 & .111 & .111 & .00328 \\ .111 & .111 & .111 & .111 & .111 & .111 & .111 & .111 & .111 & .00356 \\ .111 & .111 & .111 & .111 & .111 & .111 & .111 & .111 & .111 & .00328 \\ .111 & .111 & .111 & .111 & .111 & .111 & .111 & .111 & .111 & .00356 \\ .111 & .111 & .111 & .111 & .111 & .111 & .111 & .111 & .111 & .00467 \\ .111 & .111 & .111 & .111 & .111 & .111 & .111 & .111 & .111 & .00356 \\ .111 & .111 & .111 & .111 & .111 & .111 & .111 & .111 & .111 & .00328 \\ .111 & .111 & .111 & .111 & .111 & .111 & .111 & .111 & .111 & .00356 \\ .111 & .111 & .111 & .111 & .111 & .111 & .111 & .111 & .111 & .00328 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

A^{*32} represents a quasi-steady state in which the shape of the surface representing u does not change, but its level rises uniformly at a constant rate. The complete solution at large t can be considered to consist of two parts: (1) an individual part, characteristic for each node, which is steadily increasing since it is the result of the continuously operating source at node No. 5 (this part is contained in the last column and therefore independent of the initial condition); and (2) a part that is equal for all nodes and is the average of the initial values, in this case 1/9 (.111) times the sum of all the nodal values at t = 0; it thus represents "what was in the bucket" at the beginning and is still there, but evenly distributed over all the nodes.

EFFICIENCY IN COMPARISON WITH THE STANDARD FORWARD METHOD

Although the exponentially increasing time steps of the method of successive squaring seem, at first sight, to provide a great improvement in calculating efficiency, the method suffers from the disadvantage of a larger number of operations per time step. In the standard forward difference method, the number of additions and the number of multiplications is approximately 3 m, 5 m, or 7 m per time

step, for respectively 1-dimensional, 2-dimensional, and 3-dimensional problems, where m is the number of nodes. Thus to carry the solution forward to $t = 2^n \Delta t$ requires $pm2^n$ multiplications, where p = 3, 5, or 7, and approximately the same number of additions.

In the method of successive squaring, the (m+1)m matrix elements (not counting the last row, which does not change) must be calculated at (m+1) additions and the same number of multiplications per element per squaring. Also, to calculate the vector u at each step, an additional m(m+1) multiplications and the same number of additions are required.

Thus, in the method of successive squaring for n iterations, that is, for $t = 2^n \Delta t$, a total of $n[(m+1)^2 m + m(m+1)] = nm(m+1)(m+2)$ additions and the same number of multiplications are needed. And only if

$$(m+1)(m+2) < p\, 2^n/n$$

will the method of successive squaring be more efficient than the standard forward method. For a 2-dimensional problem with n = 10, that is, last calculated values at $t = 1024\ \Delta t$, the number of nodes must be less than 21, and with 40 nodes, the solutions must be carried forward at least to $t = 8192\ \Delta t = 2^{13} \Delta t$ for successive squaring to be the more efficient.

APPLICATION TO IMPLICIT FORMULATIONS

Implicit finite difference methods can be expressed in matrix form as

$$Au^{n+1} = Bu^n + c \qquad (12)$$

Again, if the vector c and the matrices A and B are invariant, Equation 12 can be premultiplied by A^{-1}, the inverse of A:

$$u^{n+1} = A^{-1} Bu^n + A^{-1}c$$

or

$$u^{n+1} = Du^n + d \qquad (13)$$

where

$$D = A^{-1}B$$

and

$$d = A^{-1}c$$

Equation 13 can then be extended to

$$u^{n+1} = D^* u^n$$

where

$$D^* = \left| \begin{array}{c|c} D & d \\ \hline 0 & 1 \end{array} \right|$$

Thus the method of successive squaring can be applied to implicit formulations as well.

IN CONCLUSION

Although the method of successive squaring has been described here for the solution of a particular partial differential equation and its forward finite difference approximation, the method is applicable to

all types of equations that in finite approximation can be expressed by the matrix equation

$$Au^{n+1} = Bu^{n} + c$$

provided the matrices A and B, and the vector c are time invariants, and the inverse A^{-1} of A exists. These requirements clearly limit the method to linear differential equations.

The method becomes efficient only after a certain number of iterations is exceeded, which number increases with the number of nodes.

As an aside, it has been shown that it is possible to step backwards through time to arrive from an observed state at some point in time to a previous state that gave rise to it. A closer inspection of this possibility may, however, reveal that this type of "historical research" will soon abort because of round-off error.

Environnement Canada Environment Canada

Institut national de recherche en hydrologie

RAPPORT Nº 37 DE L'INRH
ÉTUDE Nº 152, COLLECTION DES RAPPORTS TECHNIQUES DE LA DGEI

Procédé à différences finies en avant à pas temporels augmentant exponentiellement : la méthode des mises au carré successives

A. Vandenberg

INRH

DIRECTION GÉNÉRALE DES EAUX INTÉRIEURES ET DES TERRES
INSTITUT NATIONAL DE RECHERCHE EN HYDROLOGIE
CENTRE NATIONAL DE RECHERCHE EN HYDROLOGIE
SASKATOON (SASKATCHEWAN) 1987

(Available in English on request)

Publié avec l'autorisation
du ministre de l'Environnement

© Ministre des Approvisionnements et Services Canada 1987

N° de cat. En 36-503/152F

ISBN 0-662-94334-1

Table des matières

Page

RESUME..... iv

ABSTRACT..... v

INTRODUCTION..... 1

LA METHODE..... 1

EXEMPLES..... 6

EFFICACITE EN COMPARAISON AVEC LA METHODE EN AVANT STANDARD..... 12

APPLICATION AUX FORMULATIONS IMPLICITES..... 13

CONCLUSION..... 14

Illustrations

Figure 1. Notation utilisée dans l'approximation aux différences finies..... 3

Figure 2. Configuration, valeurs initiales et valeurs frontières du premier exemple..... 6

Figure 3. Configuration du deuxième exemple..... 10

Résumé

La formulation à différences finies en avant d'équations aux dérivées partielles conduit à l'équation matricielle

$$u^{n+1} = Au^n + c$$

dans laquelle la matrice A et le vecteur c sont des constantes, tandis que l'équation différentielle et les conditions limites ne possèdent pas de coefficients dépendant du temps. Par un artifice simple, cette équation peut s'écrire

$$u^{n+1} = A^* u^n$$

après quoi, à la $m^{ième}$ mise au carré successive de A*, la valeur de u est calculée au moment égal à 2^m fois le pas temporel initial.

Abstract

The forward finite difference formulation of linear partial differential equations leads to the matrix equation

$$u^{n+1} = Au^{n} + c$$

in which the matrix A and the vector c are constant whenever the differential equation and boundary conditions have no time-dependent coefficients. By a slight artifice, this equation can be changed to

$$u^{n+1} = A^{*}\, u^{n}$$

after which, on the m^{th} successive squaring of A*, the value of u is calculated at a time that is 2^{m} times the original time step.

Procédé à différences finies en avant à pas temporels augmentant exponentiellement : la méthode des mises au carré successives

A. Vandenberg

INTRODUCTION

De toutes les méthodes de résolution numérique d'un système d'équations aux dérivées partielles, la méthode à différences finies en avant est la plus simple, puisque les valeurs de la variable indépendante aux noeuds spatiaux après un pas temporel Δt sont calculées explicitement à partir des valeurs connues avant le pas temporel, ce qui élimine la nécessité de résoudre simultanément les équations pour tous les noeuds, comme c'est le cas pour les méthodes implicites. La méthode en avant a cependant été abandonnée puisque le pas temporel doit toujours être gardé sous un certain seuil critique maximal pour que la méthode demeure stable. Il sera montré dans la présente étude que pour certains types de problèmes aux limites à équations différentielles linéaires, il est possible d'augmenter la grandeur du pas de la formulation à différences finies en avant d'un facteur deux à chacune des itérations.

LA METHODE

On se servira de l'équation parabolique dans l'espace bidimensionnel pour élaborer la méthode, bien que celle-ci puisse également être appliquée à d'autres types d'équations linéaires:

$$\partial u/dt = \alpha(x,y)\partial^2 u/\partial x^2 + \beta(x,y)\partial^2 u/\partial y^2 + \gamma(x,y) \qquad (1)$$

Un ensemble de conditions aux limites est établi pour cette équation:

$$u = U(x,y) \text{ à } \Gamma_1 \tag{2a}$$

$$du/ds = \delta(x,y) \text{ à } \Gamma_2 \tag{2b}$$

$$c_1 u + c_2 du/ds = \varepsilon(x,y) \text{ à } \Gamma_3 \tag{2c}$$

dans lesquelles du/ds = la dérivée dans la direction normale à la frontière Γ_2 ou Γ_3, c_1 et c_2 sont des constantes, et α, β, γ, δ, ε et U doivent être indépendantes du temps.

Dans la méthode à différences finies en avant, l'équation 1 est remplacée par son approximation aux différences finies:

$$u_{i,j}^{n+1} = u_{i,j}^{n} + l_{i,j} (u_{i-1,j}^{n} - 2u_{i,j}^{n} + u_{i+1,j}^{n}) + k_{i,j} (u_{i,j-1}^{n} - 2 u_{i,j}^{n} + u_{i,j+1}^{n}) + \gamma'_{i,j} \tag{3}$$

dans laquelle

$$l_{i,j} = \alpha_{i,j} \Delta t/\Delta x^2$$

$$k_{i,j} = \beta_{i,j} \Delta t/\Delta x^2$$

$$\gamma'_{i,j} = \gamma_{i,j} \Delta t$$

L'indice supérieur n indique la valeur de u au moment $t = n\Delta t$ et les indices inférieurs i et j désignent la valeur de la variable à l'intersection, dans le plan x-y, de la $i^{\text{ième}}$ ligne (grille verticale) et de la $j^{\text{ième}}$ ligne (grille horizontale) de la grille de différences finies (figure 1).

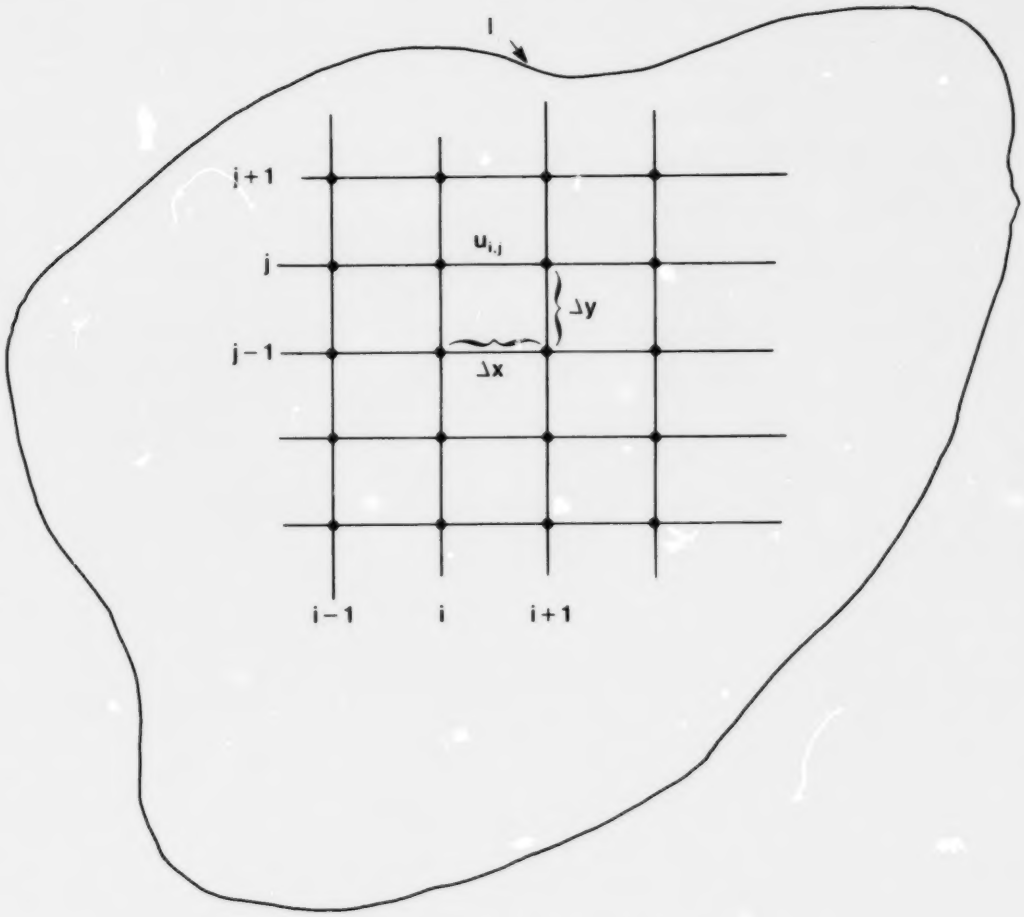

Figure 1. Notation utilisée dans l'approximation aux différences finies.

L'équation 3 est alors appliquée à chacune des intersections (noeuds) à tour de rôle, exception faite des noeuds situés à la frontière Γ_1 qui sont de valeur constante. Les conditions limites du type (2b) et du type (2c) sont remplacées par des approximations à différences finies grâce auxquelles la valeur de u au noeud frontière est exprimée en terme des valeurs aux noeuds internes voisins.

Une itération, qui fait progresser la solution en avant dans le temps de $t = n\Delta t$ à $t = (n+1)\Delta t$, s'exprime alors en notation matricielle au moyen de l'équation:

$$u^{n+1} = Au^n + c \tag{4}$$

dans laquelle u^n et u^{n+1} sont les vecteurs des valeurs nodales de u respectivement aux moments $t = n\Delta t$ and $t = (n+1)\Delta t$, à tous les m noeuds où u n'est pas constante. A est la matrice m x m résultant de l'application de l'équation 3 à tous les noeuds intérieurs à tour de rôle, les noeuds frontières non constants étant remplacés, s'ils apparaissent, par des expressions appropriées obtenues de (2b) et (2c); c est le vecteur des termes constants dérivant du terme $\gamma'_{i,j}$ de l'équation 3 et des valeurs aux frontières constantes à Γ_1.

Ainsi, en commençant avec n = 0, on calcule à partir de u°, le vecteur des conditions initiales:

$$\begin{aligned} u^1 &= u(\Delta t) = Au^\circ + c \\ u^2 &= u(2\Delta t) = Au^1 + c = A^2u^\circ + Ac + c \\ u^3 &= u(3\Delta t) = A^3u^\circ + A^2c + Ac + c \\ u^n &= u(n\Delta t) = A^nu^\circ + c \sum_{i=0}^{n-1} A^i \end{aligned} \tag{5}$$

Cependant la somme apparaissant dans (5) représente un effort de calcul dont on peut bien se dispenser, et il serait de beaucoup préférable d'avoir, plutôt que l'équation 5, une équation de la forme

$$u^n = A^nu^\circ \tag{6}$$

ou, en général,

$$u^{k+n} = A^nu^k \tag{7}$$

car alors il vient

$$u^2 = u(2\Delta t) = A^2 u^\circ$$
$$u^4 = u(4\Delta t) = A^4 u^\circ$$

etc.; les mises au carré successives de A permettraient alors de calculer u aux moments $t = \Delta t$, $2\Delta t$, $4\Delta t$, ou, de façon générale, au moment $t = 2^n \Delta t$ à la $n^{ième}$ itération.

Il est possible d'obtenir une équation du type (7) à partir de l'équation 4 en introduisant une variable liée supplémentaire, $\bar{u}$, comme étant le $(m+1)^{ième}$ élément de u, et en assignant à $\bar{u}$ la valeur constante:

$$\bar{u} = 1$$

L'équation 4 peut alors s'écrire

$$u^{n+1} = A^* u^n \qquad (8)$$

dans laquelle

$$A^* = \left[\begin{array}{cccc|c} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1m} & c_1 \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2m} & c_2 \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots \\ a_{m1} & a_{m2} & \cdots & a_m a_m & c_m \\ \hline 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 \end{array}\right] = \left[\begin{array}{c|c} A & c \\ \hline 0 & 1 \end{array}\right]$$

La matrice contient maintenant (dernière colonne) le vecteur des constantes c qu'on interprète maintenant comme étant le vecteur des coefficients de la variable liée $\bar{u}$ dans l'équation matricielle 8. La dernière rangée de la matrice exprime le fait que:

$$\bar{u}^{n+1} = \bar{u}^{n}$$

c'est-à-dire que $\bar{u}$ est une constante.

Ainsi sont satisfaites toutes les conditions permettant de résoudre l'équation 3 au moyen d'une méthode des mises au carré successives. Cette méthode sera illustrée au moyen de deux exemples.

EXEMPLES

Dans le premier exemple, on cherche à résoudre l'équation 1 dans le domaine montré à la figure 2; la fonction u est constante sur toute la frontière, ses valeurs étant données à la figure 2. Les valeurs initiales aux trois noeuds internes sont également données entre parenthèses à la même figure. Il n'existe pas de terme source ni de terme puits: γ est nul partout. Manifestement la solution tend vers

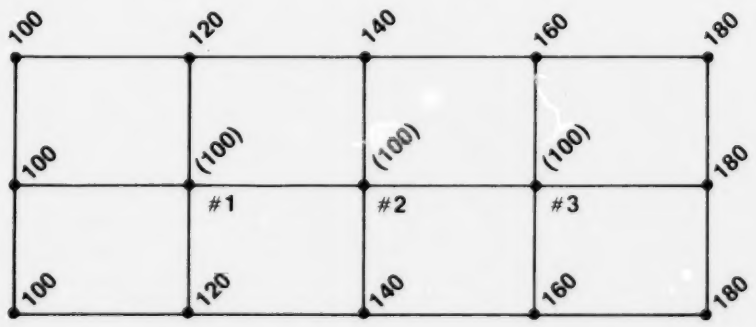

Figure 2. Configuration, valeurs initiales et valeurs frontières du premier exemple.

un état permanent, u_1, u_2, et u_3 étant égales respectivement à 120, 140, et 160.

En posant $l_{i,j}$ et $k_{i,j}$ égaux à 0.2 à tous les noeuds, on réduit l'équation 3 à l'ensemble des trois équations:

$$u_1^{n+1} = 0.2u_1^n + 0.2u_2^n + 0.2\,(100 + 120 + 120)$$

$$u_2^{n+1} = 0.2u_1^n + 0.2u_2^n + 0.2u_3^n + 0.2\,(140 + 140)$$

$$u_3^{n+1} = 0.2u_2^n + 0.2u_3^n + 0.2\,(180 + 160 + 160)$$

qui avec l'introduction de $\bar{u}$ devient l'ensemble des quatre équations:

$$u_1^{n+1} = 0.2u_1^n + 0.2u_2^n + 68\,\bar{u}$$

$$u_2^{n+1} = 0.2u_1^n + 0.2u_2^n + 0.2u_3^n + 56\,\bar{u}$$

$$u_3^{n+1} = 0.2u_2^n + 0.2u_3^n + 100\,\bar{u}$$

$$\bar{u} = \bar{u}$$

qui peuvent également s'inscrire sous la forme matricielle:

$$u^{n+1} = A*u^n$$

dans laquelle

$$A = \begin{bmatrix} .2 & .2 & 0 & 68 \\ .2 & .2 & .2 & 56 \\ 0 & .2 & .2 & 100 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

La mise au carré successive de A* donne:

$$A^{*2} = \begin{bmatrix} .08 & .08 & .04 & 92.8 \\ .08 & .12 & .08 & 100.8 \\ .04 & .08 & .08 & 131.2 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad A^{*4} = \begin{bmatrix} .014 & .019 & .013 & 113.54 \\ .019 & .027 & .019 & 130.82 \\ .013 & .019 & .014 & 153.47 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

$$A^{*8} = \begin{bmatrix} .00074 & .00104 & .00074 & 119.65 \\ .00104 & .00148 & .00104 & 139.50 \\ .00074 & .00104 & .00074 & 159.65 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad A^{*16} = \begin{bmatrix} - & - & - & 120.0 \\ - & - & - & 140.0 \\ - & - & - & 160.0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

Les éléments des puissances de A* convergent donc tous vers zéro, exception faite des éléments de la dernière colonne qui représentent la solution en régime permanent du problème. Cette forme finale est typique de tous les problèmes qui parviennent à un état permanent au moment $t \to \infty$. On peut noter que la mise au carré supplémentaire de A^{*16} n'a pratiquement aucun effet, c'est-à-dire que pour un grand n

$$A^{*2n} \sim A^{*n}$$

De la même manière, les conditions initiales n'ont aucune influence sur la solution en régime permanent qui est déterminée totalement par les conditions aux frontières.

Il y a lieu également de souligner l'existence des matrices inverses de A et A*, A^{-1} et A^{*-1}. De l'équation 4 il vient

$$u^n = A^{-1} (u^{n+1} - c) \qquad (9)$$

et de l'équation 8

$$u^n = A^{*-1}\, u^{n+1} \tag{10}$$

L'une ou l'autre de ces équations peut servir à remonter dans le temps et il n'y a aucune raison interdisant de remonter au-delà du moment t = 0. L'équation 10 permet cette démarche par la mise au carré successive à vitesse de plus en plus grande. Il faut cependant noter que les puissances élevées de A^*, par exemple A^{*16}, sont de plus en plus mal conditionnées. Plus la solution s'approche donc de l'état permanent, la précision avec laquelle il est possible de retrouver les états antérieurs est de moins en moins grande.

En poursuivant l'évaluation de la solution de l'exemple, nous calculons

$$A^{*-1} = \begin{bmatrix} 0 & 5 & -5 & 220 \\ 5 & -5 & 5 & -560 \\ -5 & 5 & 0 & 60 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

et obtenons ainsi

$$u^{-1} = u\,(t = -\Delta t) = A^{*-1}\, u^{\circ}$$
$$u^{-2} = u\,(t = -2\Delta t) = A^{*-1}\, u^{-1}$$
$$u^{-3} = u\,(t = -3\Delta t) = A^{*-1}\, u^{-2}$$

ce qui donne

$$u^{-1} = \quad 220, \quad -60, \quad +60$$
$$u^{-2} = \quad -380, \quad +1140, \quad -1340$$
$$u^{-3} = +12620, \quad -14860, \quad +7660$$

Par conséquent, bien que mathématiquement fondées, ces «solutions» au moment négatif t perdent rapidement tout sens physique, dans ce cas.

Dans le deuxième exemple, le résultat est illustré lorsque le système ne converge pas vers un état permanent, comme c'est le cas par exemple pour la configuration de la figure 3, dans laquelle la frontière est du type «sans flux transversant», c'est-à-dire que

$$du/ds = 0 \qquad \text{à } \Gamma$$

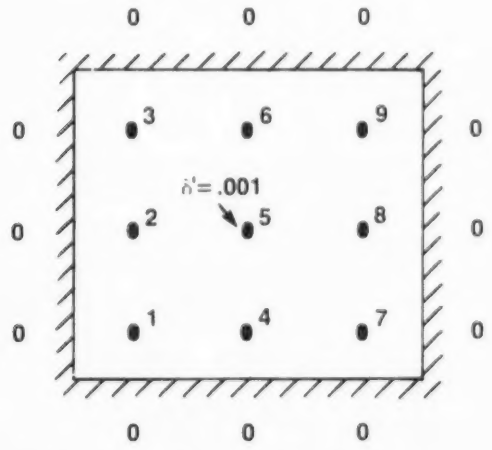

Figure 3. Configuration du deuxième exemple

Ainsi, par exemple, les deux noeuds virtuels à l'extérieur de la frontière et opposés au noeud n° 1 à l'intérieur de la région, ont même valeur que le noeud n°1, à tout moment. De plus, il existe une source constante, $\gamma' = .001$, au noeud n°5, au centre. En posant à nouveau $l_{i,j}$ et $k_{i,j}$ égaux à 0.2, l'équivalent de l'équation 3 devient

$$u_{i,j}^{n+1} = 0.2\,(u_{i-1,j}^{n} + u_{i+i,j}^{n} + u_{i,j-1}^{n} + u_{i,j+1}^{n} + u_{i,j}^{n}) + \gamma' \qquad (11)$$

En appliquant l'équation 11 à chacun des neuf noeuds internes de la figure 3, on obtient la matrice A*:

$$A^* = \begin{bmatrix} .6 & .2 & 0 & .2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ .2 & .4 & .2 & 0 & .2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & .2 & .6 & 0 & 0 & .2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ .2 & 0 & 0 & .4 & .2 & 0 & .2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & .2 & 0 & .2 & .2 & .2 & 0 & .2 & 0 & 0.001 \\ 0 & 0 & .2 & 0 & .2 & .4 & 0 & 0 & .2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & .2 & 0 & 0 & .6 & .2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & .2 & 0 & .2 & .4 & .2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & .2 & 0 & .2 & .6 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

Après quelques mises au carré successives, cette matrice prend la forme

$$A^{*32} = \begin{bmatrix} .111 & .111 & .111 & .111 & .111 & .111 & .111 & .111 & .111 & .00328 \\ .111 & .111 & .111 & .111 & .111 & .111 & .111 & .111 & .111 & .00356 \\ .111 & .111 & .111 & .111 & .111 & .111 & .111 & .111 & .111 & .00328 \\ .111 & .111 & .111 & .111 & .111 & .111 & .111 & .111 & .111 & .00356 \\ .111 & .111 & .111 & .111 & .111 & .111 & .111 & .111 & .111 & .00467 \\ .111 & .111 & .111 & .111 & .111 & .111 & .111 & .111 & .111 & .00356 \\ .111 & .111 & .111 & .111 & .111 & .111 & .111 & .111 & .111 & .00328 \\ .111 & .111 & .111 & .111 & .111 & .111 & .111 & .111 & .111 & .00356 \\ .111 & .111 & .111 & .111 & .111 & .111 & .111 & .111 & .111 & .00328 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

Cette matrice A^{*32} représente un régime quasi permanent dans lequel la forme de la surface représentant u ne change pas, mais dont le niveau s'élève uniformément à vitesse constante. On peut considérer que la solution complète, quand t est grand, se compose de deux parties: 1) une partie individuelle, caractéristique de chacun des noeuds, qui augmente régulièrement puisqu'elle est le résultat de la source présente au noeud 5 (cette partie est contenue dans la dernière colonne et est donc indépendante des conditions initiales); 2) une partie, la même pour tous les noeuds, qui est la moyenne des valeurs initiales, dans ce cas

1/9 (.111) fois la somme de toutes les valeurs nodales à l'instant t = 0; cette partie représente donc «ce qui était présent dans le seau» au début et qui s'y trouve encore, mais distribué uniformément sur tous les noeuds.

EFFICACITE EN COMPARAISON AVEC LA METHODE EN AVANT STANDARD

Bien que l'emploi de pas temporels à croissance exponentielle dans la méthode des mises au carré successives semble, à première vue, améliorer considérablement l'efficacité du calcul, la méthode présente l'inconvénient de compter un grand nombre d'opérations par pas temporels. Dans la méthode à différences finies en avant standard, le nombre d'additions et le nombre de multiplications est d'environ 3 m, 5 m ou 7 m par pas temporels, respectivement pour des problèmes unidimensionnels, bidimensionnels et tridimensionnels, m étant le nombre de noeuds. Pour faire progresser la solution au moment $t = 2^n\Delta t$, il faut donc $pm2^n$ multiplications, où p = 3, 5, ou 7, et approximativement le même nombre d'additions.

Dans la méthode des mises au carré successives, les éléments de la matrice (m+1)m (excluant ceux de la dernière rangée qui ne changent pas) doivent être calculés au moyen de (m+1) additions et du même nombre de multiplications par éléments par mise au carré. Enfin, pour calculer le vecteur u à chaque pas, il faut m(m+1) multiplications supplémentaires et le même nombre d'additions.

Ainsi, dans cette méthode, pour n itérations, c'est-à-dire pour l'instant $t = 2^n\Delta t$, il faut au total $n[(m+1)^2m + m(m+1)] = nm(m+1)(m+2)$ additions et le même nombre de multiplications. C'est

seulement si

$$(m+1)(m+2) < p\, 2^n/n$$

que la méthode des mises au carré successives est plus efficace que la méthode en avant standard. Pour un problème bidimensionnel avec n = 10, c'est-à-dire que les dernières valeurs calculées l'ont été au moment t = 1024 Δt, le nombre de noeuds doit être inférieur à 21, et avec 40 noeuds les solutions doivent être projetées en avant au moins jusqu'à l'instant t = 8192 $\Delta t = 2^{13}\Delta t$ pour que la méthode soit plus efficace.

APPLICATION AUX FORMULATIONS IMPLICITES

Les méthodes à différences finies implicites peuvent être exprimées sous la forme matricielle:

$$Au^{n+1} = Bu^n + c \qquad (12)$$

De nouveau, si le vecteur c et les matrices A et B sont invariants, l'équation 12 peut être multipliée par la matrice A^{-1}, l'inverse de A:

$$u^{n+1} = A^{-1} Bu^n + A^{-1}c$$

ou

$$u^{n+1} = Du^n + d \qquad (13)$$

dans lesquelles

$$D = A^{-1}B$$

et

$$d = A^{-1}c$$

L'équation 13 peut être développée sous la forme

$$u^{n+1} = D^* u^n$$

dans laquelle

$$D^* = \left[\begin{array}{c|c} D & d \\ \hline 0 & 1 \end{array} \right]$$

La méthode des mises au carré successives peut donc aussi être appliquée à des formulations implicites.

CONCLUSION

Bien qu'elle ait été décrite ici pour la résolution d'un système d'équations aux dérivées partielles donné et pour son approximation à différences finies en avant, la méthode des mises au carré successives peut également être appliquée à tous les types d'équations dans lesquelles l'approximation finie peut être exprimée au moyen de l'équation matricielle

$$Au^{n+1} = Bu^n + c$$

pourvu que les matrices A et B ainsi que le vecteur c soient indépendants du temps, et que la matrice inverse A^{-1} de A existe. Ces exigences limitent clairement la méthode aux équations différentielles linéaires.

La méthode est efficace uniquement après un certain nombre d'itérations, ce nombre s'accroissant avec le nombre de noeuds.

Par ailleurs, il a été montré qu'il est possible d'inverser les pas temporels pour remonter dans le temps, pour qu'à partir d'un état observé il soit possible de reconstituer l'état antérieur qui lui a donné naissance. Un examen plus attentif de cette possibilité peut cependant révéler que ce type de «recherche historique» ne mène pas à grand chose, par suite des erreurs d'arrondi.